СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р17 - 11907

И.Н.Коцев, М.И.Аройо

КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША-ГОРДАНА ДЛЯ АНТИУНИТАРНЫХ ГРУПП.

III. Точечные группы тетрагональной, орторомбической, моноклинной и триклинной сингонии

1978

P17 - 11907

И.Н.Коцев, М.И.Аройо

КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША-ГОРДАНА ДЛЯ АНТИУНИТАРНЫХ ГРУПП.

III. Точечные группы тетрагональной, орторомбической, моноклинной и триклинной сингонии

Коцев И.Н., Аройо М.И.

Р17 - 11907

Коэффициенты Клебша-Гордана для антиунитарных групп
III. Точечные группы тетрагональной, орторомбической, моноклинной и триклинной сингонии

Для однозначных и двухзначных копредставлений 44 антиунитарных шубниковских (магнитных) точечных групп тетрагональной, орторомбической, моноклинной и триклинной сингонии найдены коэффициенты Клебша-Гордана (в виде приводящих унитарных матриц). Табулированные в работе коэффициенты согласованы с коэффициентами Вигнера. Приведены также таблицы характеров, базисных функций и таблицы умножения копредставлений. Применялся метод, основанный на известной лемме Рака (обобщенной авторами на случай копредставлений антиунитарных групп), имеющий ряд преимуществ по сравнению с ранее предлагавшимися. Таблицы необходимы при решении ряда задач теории кристаллического поля и спектроскопии твердого тела (правила отбора, теорема Вигнера-Эккарта и др.).

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Kotzev I.N., Aroyo M.I.

P17 - 11907

Clebsch-Gordan Coefficients for Antiunitary Groups.
III. Point Groups of Tetragonal, Orthorombic, Monoclinic and Triclinic (Cryst.) System.

For single-and two-valued corepresentations of 44 antiunitary Shubnikov's (magnetic) point groups of tetragonal, orthorombic, monoclinic and triclinic (cryst.) system the Clebsch-Gordan coefficients have been found (as reducible unitary matrices). The coefficients tabulated are consistent to the Wigner coefficients. Tables of characters, of basis functions and multiplication ones for corepresentations are also presented. A method based on the known Racah lemma (generalized for the case of corepresentations of antiunitary groups) was applied. It has some advantages as compared to earlier used. Tables are necessary at solving some problems of crystal field theory and solid state spectroscopy (selection rules, the Wigner-Eckart theorem etc.)

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

I. В первой части настоящей работы /1/ показано, что лемма Рака, устанавливающая связь между коэффициентами Клебша-Гордана для линейных представлений некоторой группы и ее подгрупп, имеет место и для копредставлений антиунитарных групп и их подгрупп. На базе этого предложен метод и вычислены коэффициенты Клебша-Гордана для копредставлений (однозначных и двузначных) всех 90 антиунитарных шубниковских (магнитных) точечных групп /2/. Исходными для вычисления упомянутых коэффициентов являются широко известные коэффициенты Вигнера /3/ $(j_1 m_1, j_2 m_2 | j m)$. Общая схема вычислений дана во второй части /3/, где приведены таблицы для II групп кубической сингонии. При этом, используя изоморфизм групп и выбирая базисные функции копредставлений четными, при инверсии $I \in C_i$ удается существенно сократить объем таблиц: достаточно табулировать коэффициенты для 2I группы - по одной из каждого класса изоморфных групп (см. табл. I в /3/). Коэффициенты для групп типа $G \times C_i$ находятся из соответствующих коэффициентов групп G с помощью соотношений

$$[\beta_1^{\pm} b_1, \beta_2^{\pm} b_2 | \beta^{+} \rho_\beta b] = [\beta_1^{\mp} b_1, \beta_2^{\pm} b_2 | \beta^{-} \rho_\beta b] = [\beta_1 b_1, \beta_2 b_2 | \beta \rho_\beta b]. \quad (I)$$

В этой части работы даны таблицы для антиунитарных шубниковских точечных групп тетрагональной (табл.5-9), орторомбической (табл. I0,II) моноклинной (табл.I2,I3) и триклинной (табл.I4) сингонии. Группы гексагональной и тригональной сингонии рассматриваются в /4/.

Применяемая при вычислении схема последовательного спуска по цепочкам подгрупп /1/ для каждой сингонии поясняется соответствующим рисунком.

2. Каждая из таблиц имеет следующую структуру.

а) Таблица характеров и базисных функций копредставлений, построенная по образцу стандартных таблиц для обычных представлений точечных групп /5,6/. Указаны также символы Δ^{β} неприводимых представлений унитарной подгруппы, "квазимомент" $j(\beta)$ и его "проекции" $\mu(\beta)$, тип копредставления по Вингеру, характеры и матрицы фиксированного антиунитарного оператора a_0.

б) Таблица соответствия копредставлений - редукция копредставлений D^{α} группы $\mathcal{A}$ на подгруппу $\mathcal{B}$.

в) Таблица умножения копредставлений. Для удобства указаны лишь номера копредставлений, а кратность повторения c_β копредставления β дается в виде степенного показателя: β^{c_β}.

г) Таблица коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений. Приведены унитарные матрицы $U^{\beta_1\beta_2}$, приводящие кронекеровские произведения копредставлений к квазидиагональному виду. Для краткости опущены тривиальные коэффициенты $[1 1, \beta_2 b_2 | \beta_2 1 b_2] = 1$, а также матрицы $U^{\beta_2\beta_1}$. Соответствующие им коэффициенты определяются соотношением

$$[\beta_2 b_2, \beta_1 b_1 | \beta \rho_\beta b] = (-1)^{j(\beta_1)+j(\beta_2)-j(\beta\rho_\beta)} [\beta_1 b_1, \beta_2 b_2 | \beta \rho_\beta b]. \quad (2)$$

В отличие от аналогичного соотношения для коэффициентов Вигнера здесь квазимоменты $j(\beta\rho_\beta)$ повторяющихся копредставлений могут быть различными /3/, что указывается возле соответствующей матрицы $U^{\beta_1\beta_2}$. Для удобства звездочкой над β отмечены те столбцы матриц $U^{\beta_1\beta_2}$, элементы которых в соответствии с (2) меняют знак при перестановке индексов $\beta_1 b_1 \rightleftarrows \beta_2 b_2$.

Примеры применения выведенных коэффициентов приведены в /2,7/.

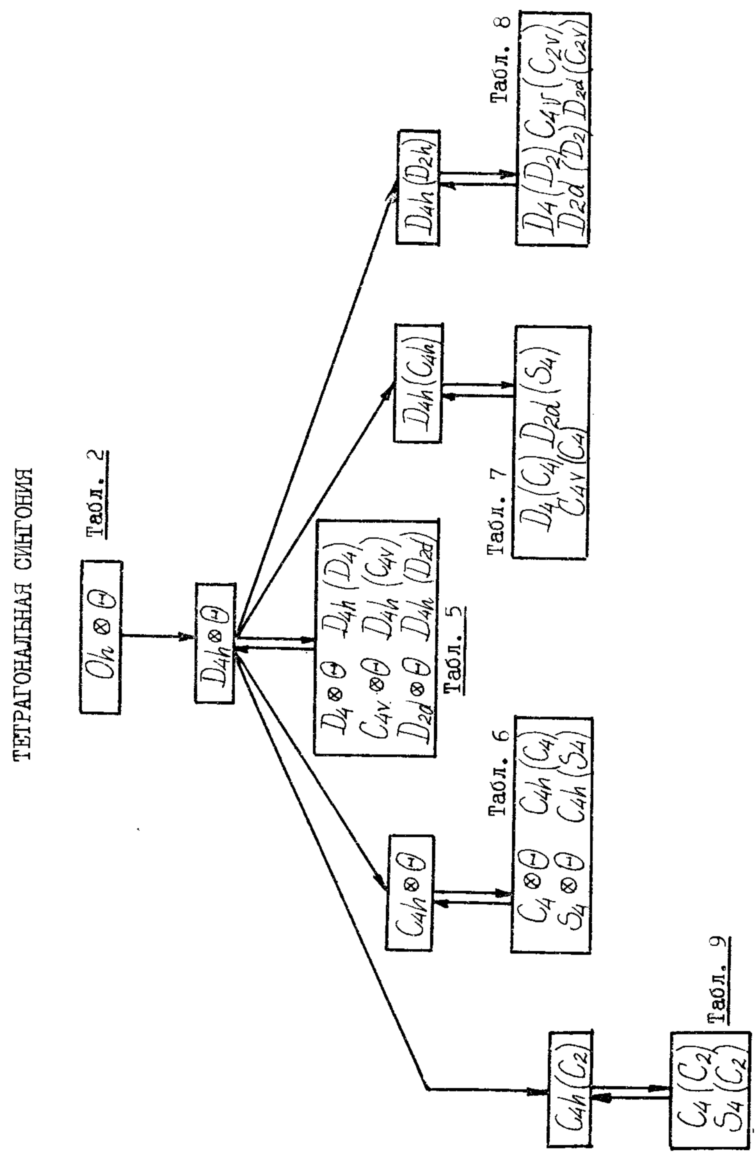

Рис. 1. Схема вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений

Таблица 5а*

G					$u \in H \subset G$					a_0	
$D_4 \otimes \Theta = 4221'$					E	$2C_4$	(C_2)	$(2C_2')$	$(2C_2'')$	Θ	$\psi_b^{\beta\tau_\beta}$
$D_{4h}(D_4) = 4/m'mm'$					E	$2C_4$	(C_2)	$(2C_2')$	$(2C_2'')$	$J\Theta$	
$C_{4v} \otimes \Theta = 4mm1'$					E	$2C_4$	(C_2)	$(2\sigma_v)$	$(2\sigma_d)$	Θ	
$D_{4h}(C_{4v}) = 4/m'mm$					E	$2C_4$	(C_2)	$(2\sigma_v)$	$(2\sigma_d)$	$J\Theta$	
$D_{2d} \otimes \Theta = \bar{4}2m1'$					E	$2C_4$	(C_2)	$(2C_2')$	$(2\sigma_d)$	Θ	
$D_{4h}(D_{2d}) = 4'/m'm'm$					E	$2S_4$	(C_2)	$(2C_2')$	$(2\sigma_d)$	$J\Theta$	
D_β	Δ^β		$j(D_\beta)$	$\mu(D_\beta)$							
D_1	$\Gamma_1 = A_1$	a	0	0	1	1	1	1	1	1	φ_0^0
D_2	$\Gamma_2 = A_2$	a	1	0	1	1	1	−1	−1	−1	φ_0^1
D_3	$\Gamma_3 = B_1$	a	2	2	1	−1	1	1	−1	1	$\sqrt{1/2}(\varphi_2^2 + \varphi_{-2}^2)$
D_4	$\Gamma_4 = B_2$	a	2	−2	1	−1	1	−1	1	1	$i\sqrt{1/2}(\varphi_2^2 - \varphi_{-2}^2)$
D_5	$\Gamma_5 = E$	a	1	1 −1	2	0	−2	0	0	0	$\varphi_1^1,\ \varphi_{-1}^1$
D_6	$\Gamma_6 = \bar{E}_1$	a	1/2	1/2 −1/2	2	$\sqrt{2}$	0	0	0	0	$\varphi_{1/2}^{1/2},\ \varphi_{-1/2}^{1/2}$
D_7	$\Gamma_7 = \bar{E}_2$	a	3/2	3/2 −3/2	2	$-\sqrt{2}$	0	0	0	0	$\varphi_{3/2}^{3/2},\ \varphi_{-3/2}^{3/2}$

$$D_{4h} \otimes \Theta = D_4 \otimes \Theta \otimes C_i - 4/m\,mm1' = 4221' \otimes \bar{1}$$

$$D_5(d_0) = \begin{Vmatrix} & 1 \\ 1 & \end{Vmatrix} \qquad D_6(d_0) = \begin{Vmatrix} & -1 \\ 1 & \end{Vmatrix} \qquad D_7(d_0) = \begin{Vmatrix} & -1 \\ 1 & \end{Vmatrix}$$

Таблица 5б

$D_\alpha(O \times \Theta)$	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7	D_8
$D_\beta(D_4 \times \Theta)$	D_1	D_3	$D_1 + D_3$	$D_2 + D_5$	$D_4 + D_5$	D_6	D_7	$D_6 + D_7$

Таблица 5в

	1	2	3	4	5	6	7
1	[1]	2	3	4	5	6	7
2	2	[1]	4	3	5	6	7
3	3	4	[1]	2	5	7	6
4	4	3	2	[1]	5	7	6
5	5	5	5	5	[1+3+4]+{2}	6+7	6+7
6	6	6	7	7	6+7	[2+5]+{1}	3+4+5
7	7	7	6	6	6+7	3+4+5	[2+5]+{1}

* Нумерация таблиц общая для всех работ этого цикла.

Таблица 5г

[2121|111] = −1   [2131|411] = i

[3131|111] = 1   [2141|311] = $-i$

[4141|111] = −1   [3141|211] = $-i$

U^{25}

β	$\overset{*}{5}$	$\overset{*}{5}$
p_β	1	1
b	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$		
21 51	−1	
21 52		1

U^{55}

β	1	$\overset{*}{2}$	3	4
p_β	1	1	1	1
b	1	1	1	1
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$				
51 51			$\sqrt{1/2}$	$-i\sqrt{1/2}$
51 52	$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		
52 51	$\sqrt{1/2}$	$-\sqrt{1/2}$		
52 52			$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$

U^{66}

β	$\overset{*}{1}$	2	5	5
p_β	1	1	1	1
b	1	1	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$				
61 61			1	
61 62	$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		
62 61	$-\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		
62 62				1

U^{77}

β	$\overset{*}{1}$	2	5	5
p_β	1	1	1	1
b	1	1	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$				
71 71				−1
71 72	$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		
72 71	$-\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		
72 72			−1	

U^{56}

β	$\overset{*}{6}$	$\overset{*}{6}$	7	7
p_β	1	1	1	1
b	1	2	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$				
51 61			1	
51 62	1			
52 61		−1		
52 62				1

U^{57}

β	$\overset{*}{6}$	$\overset{*}{6}$	7	7
p_β	1	1	1	1
b	1	2	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$				
51 71				−1
51 72		1		
52 71	−1			
52 72			1	

U^{67}

β	3	4	$\overset{*}{5}$	$\overset{*}{5}$
p_β	1	1	1	1
b	1	1	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$				
61 71	$\sqrt{1/2}$	$-i\sqrt{1/2}$		
61 72				1
62 71			−1	
62 72	$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		

U^{26}

β	$\overset{*}{6}$	$\overset{*}{6}$
p_β	1	1
b	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$		
21 61	−1	
21 62		1

U^{27}

β	$\overset{*}{7}$	$\overset{*}{7}$
p_β	1	1
b	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$		
21 71	−1	
21 72		1

U^{35}

β	5	5
p_β	1	1
b	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$		
31 51		1
31 52	1	

U^{36}

β	$\overset{*}{7}$	$\overset{*}{7}$
p_β	1	1
b	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$		
31 61		−1
31 62	1	

U^{37}

β	$\overset{*}{6}$	$\overset{*}{6}$
p_β	1	1
b	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$		
31 71		−1
31 72	1	

U^{45}

β	5	5
p_β	1	1
b	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$		
41 51		$-i$
41 52	i	

U^{46}

β	$\overset{*}{7}$	$\overset{*}{7}$
p_β	1	1
b	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$		
41 61		$-i$
41 62	$-i$	

U^{47}

β	$\overset{*}{6}$	$\overset{*}{6}$
p_β	1	1
b	1	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$		
41 71	$-i$	
41 72		i

Таблица 6а

G					$u \in H \subset G$	a_0	
$C_4 \otimes \Theta = 41'$					$E \; C_4 \; C_2 \; C_4^{-1}$	Θ	$\psi_b^{\beta\tau_\beta}$
$C_{4h}(C_4) = 4'/m'$					$E \; C_4 \; C_2 \; C_4^{-1}$	$I\Theta$	
$S_4 \otimes (\Theta) = \bar{4}1'$					$E \; S_4^{-1} \; C_2 \; S_4$	Θ	
$C_h(S_4) = 4'/m'$					$E \; S_4^{-1} \; C_2 \; S_4$	$I\Theta$	
D_β	Δ^β		$j(D_\beta)$	$\mu(D_\beta)$			
D_1	$\Gamma_1 = A$	a	0	0	$1 \; 1 \; 1 \; 1$	1	φ_0^0
D_2	$\Gamma_2 = B$	a	2	2	$1 \; -1 \; 1 \; -1$	1	$\sqrt{1/2}(\varphi_2^2 + \varphi_{-2}^2)$
D_3	$\Gamma_3 = {}^1E$, $\Gamma_4 = {}^2E$	c	1	$1 \; -1$	$1 \; i \; -1 \; -i$; $1 \; -i \; -1 \; i$	0	$\varphi_1^1, \; \varphi_{-1}^1$
D_5	$\Gamma_5 = {}^1\bar{E}_1$, $\Gamma_6 = {}^2\bar{E}_1$	c	$1/2$	$1/2 \; -1/2$	$1 \; \omega \; i \; -\omega^*$; $1 \; \omega^* \; -i \; -\omega$	0	$\varphi_{1/2}^{1/2}, \; \varphi_{-1/2}^{1/2}$
D_8	$\Gamma_8 = {}^1\bar{E}_2$, $\Gamma_7 = {}^2\bar{E}_2$	c	$3/2$	$3/2 \; -3/2$	$1 \; -\omega^* \; -i \; \omega$; $1 \; -\omega \; i \; \omega^*$	0	$\varphi_{3/2}^{3/2}, \; \varphi_{-3/2}^{3/2}$

$$C_4 \otimes \Theta = C_4 \otimes \Theta \otimes C_i - 4/m1' = 41' \otimes \bar{1}$$

$$D_3(a_0) = \begin{Vmatrix} & 1 \\ 1 & \end{Vmatrix}$$

$$D_5(a_0) = \begin{Vmatrix} & -1 \\ 1 & \end{Vmatrix}$$

$$D_8(a_0) = \begin{Vmatrix} & -1 \\ 1 & \end{Vmatrix}$$

$$\omega = \exp(\pi i/4)$$

Таблица 6б

$D_\alpha(D_4 \otimes \Theta)$	$D_1 \; D_2 \; D_3 \; D_4 \; D_5$	$D_6 \; D_7$
$D_\beta(C_4 \otimes \Theta)$	$D_1 \; D_1 \; D_2 \; D_2 \; D_3$	$D_5 \; D_8$

Таблица 6в

	1	2	3	5	8
1	[1]	2	3	5	8
2	2	[1]	3	8	5
3	3	3	$[1+2^2]+\{1\}$	5+8	5+8
5	5	8	5+8	$[1+3]+\{1\}$	2^2+3
8	8	5	5+8	2^2+3	$[1+3]+\{1\}$

Таблица 6г

$$[2121 \mid 111] = 1$$

U^{33} $\beta_1 b_1 \; \beta_2 b_2$ \ β / ρ_β / b	1 / 1 / 1	$\overset{*}{1}$ / 2 / 1	2 / 1 / 1	2 / 2 / 1
31 31			$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$
31 32	$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
32 31	$\sqrt{1/2}$	$-i\sqrt{1/2}$		
32 32			$\sqrt{1/2}$	$-i\sqrt{1/2}$

$j(\rho\,\rho_\beta) = 0, \; 1, \; 2$

U^{55} $\beta_1 b_1 \; \beta_2 b_2$ \ β / ρ_β / b	$\overset{*}{1}$ / 1 / 1	1 / 2 / 1	3 / 1 / 1	3 / 1 / 2
51 51			1	
51 52	$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
52 51	$-\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
52 52				1

0 1 1

U^{88} $\beta_1 b_1 \; \beta_2 b_2$ \ β / ρ_β / b	$\overset{*}{1}$ / 1 / 1	1 / 2 / 1	3 / 1 / 1	3 / 1 / 2
81 81				1
81 82	$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
82 81	$-\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
82 82			1	

0 1 1

Таблица 6г (продолжение)

U^{35} $\beta_1 b_1 \; \beta_2 b_2$ \ β / ρ_β / b	$\overset{*}{5}$ / 1 / 1	$\overset{*}{5}$ / 1 / 2	8 / 1 / 1	8 / 1 / 2
31 51			1	
31 52	1			
32 51		-1		
32 52				1

U^{38} $\beta_1 b_1 \; \beta_2 b_2$ \ β / ρ_β / b	5 / 1 / 1	5 / 1 / 2	$\overset{*}{8}$ / 1 / 1	$\overset{*}{8}$ / 1 / 2
31 81				-1
31 82		1		
32 81	1			
32 82			1	

U^{58} $\beta_1 b_1 \; \beta_2 b_2$ \ β / ρ_β / b	2 / 1 / 1	2 / 2 / 1	$\overset{*}{3}$ / 1 / 1	$\overset{*}{3}$ / 1 / 2
51 81	$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
51 82				1
52 81			-1	
52 82	$\sqrt{1/2}$	$-i\sqrt{1/2}$		

U^{23} $\beta_1 b_1 \; \beta_2 b_2$ \ β / ρ_β / b	3 / 1 / 1	3 / 1 / 2
21 31		1
21 32	1	

U^{25} $\beta_1 b_1 \; \beta_2 b_2$ \ β / ρ_β / b	$\overset{*}{8}$ / 1 / 1	$\overset{*}{8}$ / 1 / 2
21 51		-1
21 51	1	

U^{28} $\beta_1 b_1 \; \beta_2 b_2$ \ β / ρ_β / b	$\overset{*}{5}$ / 1 / 1	$\overset{*}{5}$ / 1 / 2
21 81		-1
21 82	1	

Таблица 7а

G					$u \in H \subset G$	a_0	
$D_4(C_4) = 42'2'$					$E \; C_4 \; C_2 \; C_4^{-1}$	$C_2^x\Theta$	$\psi_b^{\beta\tau_\beta}$
$C_{4v}(C_4) = 4m'm'$					$E \; C_4 \; C_2 \; C_4^{-1}$	$\sigma_v^x\Theta$	
$D_{2d}(S_4) = \bar{4}2'm'$					$E \; S_4^{-1} \; C_2 \; S_4$	$C_2^x\Theta$	
D_β	Δ^β		$j(D_\beta)$	$\mu(D_\beta)$			
D_1	$\Gamma_1 = A$	a	0	0	$1 \; 1 \; 1 \; 1$	1	φ_0^0
D_2	$\Gamma_2 = B$	a	2	2	$1 \; -1 \; 1 \; -1$	1	$\sqrt{1/2}(\varphi_2^2 + \varphi_{-2}^2)$
D_3	$\Gamma_3 = {}^1E$	a	1	1	$1 \; i \; -1 \; -i$	-1	φ_1^1
D_4	$\Gamma_4 = {}^2E$	a	1	-1	$1 \; -i \; -1 \; i$	-1	φ_{-1}^1
D_5	$\Gamma_5 = {}^1\bar{E}_1$	a	$1/2$	$1/2$	$1 \; \omega \; i \; -\omega^*$	i	$\varphi_{1/2}^{1/2}$
D_6	$\Gamma_6 = {}^2\bar{E}_1$	a	$1/2$	$-1/2$	$1 \; \omega^* \; -i \; -\omega$	$-i$	$\varphi_{-1/2}^{1/2}$
D_7	$\Gamma_8 = {}^1\bar{E}_2$	a	$3/2$	$3/2$	$1 \; -\omega^* \; -i \; \omega$	$-i$	$\varphi_{3/2}^{3/2}$
D_8	$\Gamma_7 = {}^2\bar{E}_2$	a	$3/2$	$-3/2$	$1 \; -\omega \; i \; \omega^*$	i	$\varphi_{-3/2}^{3/2}$

$$D_{4h}(C_{4h}) = D_4(C_4) \otimes C_i - 4'/mm'm' = 42'2' \otimes \bar{1}, \quad \omega = \exp(\pi i/4)$$

Таблица 7б

$D_\alpha(D_4 \otimes \Theta)$	$D_1 \; D_2 \; D_3 \; D_4 \; D_5$	$D_6 \quad D_7$
$D_\beta[D_4(C_4)]$	$D_1 \; D_1 \; D_2 \; D_2 \; D_3 + D_4$	$D_5 + D_6 \quad D_7 + D_8$

Таблица 7в

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1	2	3	4	5	6	7	8
2	2	1	4	3	8	7	6	5
3	3	4	2	1	7	5	8	6
4	4	3	1	2	6	8	5	7
5	5	8	7	6	3	1	2	4
6	6	7	5	8	1	4	3	2
7	7	6	8	5	2	3	4	1
8	8	5	6	7	4	2	1	3

Таблица 7г

$[21\ 21 \mid 111] = 1$	$[21\ 71 \mid 711] = -1$
$[31\ 31 \mid 211] = 1$	$[21\ 81 \mid 811] = 1$
$[41\ 41 \mid 211] = 1$	$[31\ 41 \mid 111] = 1$
$[51\ 51 \mid 311] = 1$	$[31\ 51 \mid 711] = 1$
$[61\ 61 \mid 411] = 1$	$[31\ 61 \mid 511] = 1$
$[71\ 71 \mid 411] = -1$	$[31\ 71 \mid 811] = -1$
$[81\ 81 \mid 311] = -1$	$[31\ 81 \mid 611] = 1$
$[21\ 31 \mid 411] = 1$	$[41\ 51 \mid 611] = -1$
$[21\ 41 \mid 311] = 1$	$[41\ 61 \mid 811] = 1$
$[21\ 51 \mid 811] = -1$	$[41\ 71 \mid 511] = -1$
$[21\ 61 \mid 711] = 1$	$[41\ 81 \mid 711] = 1$
$[61\ 81 \mid 211] = 1$	$[71\ 81 \mid 111] = 1$

$[51\ 61 \mid 111] = 1$ $\quad [51\ 71 \mid 211] = 1$

$[51\ 81 \mid 411] = 1$ $\quad [61\ 71 \mid 311] = -1$

Таблица 8а

G_1							$u \in H \subset G$	α_0	$\psi_b^{\beta\tau_\beta}$
$D_4(D_2) = 4'22'$							$E\ (C_2)\ (C_2')\ (C_2'')$	$C_2^{xy}\theta$	
$D_{2d}(D_2) = \bar{4}'2m'$							$E\ (C_2)\ (C_2')\ (C_2'')$	$\sigma_d^{xy}\theta$	
$C_{4v}(C_{2v}) = 4'mm'$							$E\ (C_2)\ (\sigma_v)\ (\sigma_v')$	$\sigma_d^{xy}\theta$	
$D_{2d}(C_{2v}) = \bar{4}'2'm$							$E\ (C_2)\ (\sigma_v)\ (\sigma_v')$	$C_2^{xy}\theta$	
D_β	Δ^β				$j(D_\beta)$	$m(D_\beta)$			
D_1	Γ_1	A	A_1	a	0	0	1 1 1 1	1	φ_0^0
D_2	Γ_2 Γ_4	B_2 B_3	B_1 B_2	c	1	1 −1	1 −1 1 −1 1 −1 −1 1	0	$\varphi_1^1,\ \varphi_{-1}^1$
D_3	Γ_3	B_1	A_2	a	1	0	1 1 −1 −1	1	φ_0^1
D_5	Γ_5	$\bar{E}$	$\bar{E}$	a	1/2	1/2 −1/2	2 0 0 0	$-\sqrt{2}$	$\varphi_{1/2}^{1/2},\ \varphi_{-1/2}^{1/2}$

$D_2(\alpha_0) = \begin{Vmatrix} i & \\ & -i \end{Vmatrix}$

$D_5(\alpha_0) = \begin{Vmatrix} -\varepsilon^* & \\ & -\varepsilon \end{Vmatrix}$

$\varepsilon = \exp(\pi i/4)$

$$D_{4h}(D_{2h}) = D_4(D_2) \otimes C_i - 4'/mmm' = 4'22' \otimes \bar{1}$$

Таблица 8б

$D_\alpha(D_4 \otimes \theta)$	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7
$D_\beta[D_4(D_2)]$	D_1	D_3	D_1	D_3	D_2	D_5	D_5

Таблица 8в

	1	2	3	5
1	[1]	2	3	5
2	2	$[1^2+3]+\{3\}$	2	5^2
3	3	2	[1]	5
5	5	5^2	5	$[3+2]+\{1\}$

Таблица 8г

$[31\ 31 \mid 111] = -1$

U^{32}: β / ρ_β / b	$\overset{*}{2}$ 1 1	$\overset{*}{2}$ 1 2
$\beta_1 b_1 \beta_2 b_2$		
31 21	−1	
31 22		1

U^{35}: β / ρ_β / b	$\overset{*}{5}$ 1 1	$\overset{*}{5}$ 1 2
$\beta_1 b_1 \beta_2 b_2$		
31 51	−1	
31 52		1

$U^{22\beta}$: β / ρ_β / b	1 1 1	1 2 1	$\overset{*}{3}$ 1 1	3 2 1
$\beta_1 b_1 \beta_2 b_2$				
21 21		$\sqrt{1/2}$		$-\sqrt{1/2}$
21 22	$\sqrt{1/2}$		$\sqrt{1/2}$	
22 21	$\sqrt{1/2}$		$-\sqrt{1/2}$	
21 22		$\sqrt{1/2}$		$\sqrt{1/2}$
$j(\beta, \rho_\beta) =$	0		1	2

$U^{55\beta}$: β / ρ_β / b	$\overset{*}{1}$ 1 1	3 1 1	2 1 1	2 1 2
$\beta_1 b_1 \beta_2 b_2$				
51 51			1	
51 52	$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		
52 51	$-\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}$		
52 52				1

U^{25}: β / ρ_β / b	$\overset{*}{5}$ 1 1	$\overset{*}{5}$ 1 2	5 2 1	5 2 2
$\beta_1 b_1 \beta_2 b_2$				
21 51				−1
21 52	1			
22 51		−1		
22 52			1	
	1/2		3/2	

Таблица 9а

G					$u \in H \subset G$	α_0	$\psi_b^{\beta\tau_\beta}$
$C_4(C_2) = 4'$					$E\ \ C_2$	$C_4\theta$	
$S_4(C_2) = \bar{4}'$					$E\ \ C_2$	$S_4\theta$	
D_β	Δ^β		$j(D_\beta)$	$m(D_\beta)$			
D_1	Γ_1	a	0	0	1 1	1	φ_0^0
D_2	Γ_2 Γ_2	b	1	1 −1	1 −1 1 −1	0	$\varphi_1^1,\ \varphi_{-1}^1$
D_3	Γ_3 Γ_4	c	1/2	1/2 −1/2	1 i 1 $-i$	0	$\varphi_{1/2}^{1/2},\ \varphi_{-1/2}^{1/2}$

$$C_{4h}(C_{2h}) = C_4(C_2) \otimes C_i - 4'/m = 4' \otimes \bar{1}$$

$D_2(\alpha_0) = \begin{Vmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{Vmatrix}$ $\quad D_3(\alpha_0) = \begin{Vmatrix} & -\omega \\ \omega^* & \end{Vmatrix}$ $\quad \omega = \exp(i\pi/4)$

Таблица 9б

$D_\alpha(C_4 \otimes \theta)$	D_1	D_2	D_3	D_5	D_6
$D_\beta[C_4(C_2)]$	D_1	D_1	D_2	D_3	D_3

Таблица 9в

	1	2	3
1	[1]	2	3
2	2	$[1^3]+\{1\}$	3^2
3	3	3^2	$[1+2]+\{1\}$

Таблица 9г

U^{22} β	1	$\overset{*}{1}$	1	1
ρ_β	1	2	3	4
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$ \ b	1	1	1	1
21 21			$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$
21 22	$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
22 21	$\sqrt{1/2}$	$-i\sqrt{1/2}$		
22 22			$\sqrt{1/2}$	$-i\sqrt{1/2}$

U^{33} β	$\overset{*}{1}$	1	2	2
ρ_β	1	2	1	1
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$ \ b	1	1	1	2
31 31			1	
31 32	$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
32 31	$-\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
32 32				1

U^{23} β	$\overset{*}{3}$	$\overset{*}{3}$	3	3
ρ_β	1	1	2	2
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$ \ b	1	2	1	2
21 31			1	
21 32	1			
22 31		-1		
22 32				1

$j(3,1)=\frac{1}{2}$, $j(3,2)=\frac{3}{2}$

ОРТОРОМБИЧЕСКАЯ СИНГОНИЯ

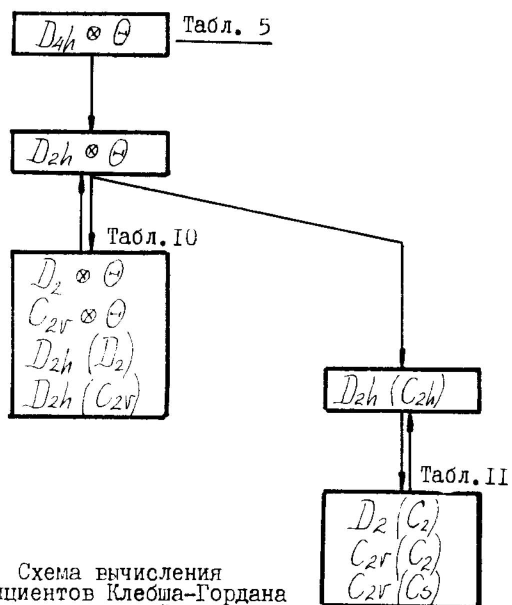

Рис. 2. Схема вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений

Таблица 10а

G						$u\in H\subset G$				d_0	$\psi_\theta^{\beta\tau_\beta}$
$D_2\otimes\Theta = 2221'$						E	(C_2^z)	(C_2')	(C_2'')	Θ	
$D_{2h}(D_2) = m'm'm'$						E	(C_2)	(C_2')	(C_2'')	$I\Theta$	
$C_{2v}\otimes\Theta = mm21'$						E	(C_2)	(σ_v)	(σ_v')	Θ	
$D_{2h}(C_{2v}) = mmm'$						E	(C_2)	(σ_v)	(σ_v')	$I\Theta$	
D_β	Δ^β			$j(D_\beta)$	$\mu(D_\beta)$						
D_1	Γ_1	A	A_1	a	0 | 0	1	1	1	1	1	φ_0^0
D_2	Γ_2	B_2	B_1	a	1 | 1	1	-1	1	-1	1	$\sqrt{1/2}(\varphi_1^1+\varphi_{-1}^1)$
D_3	Γ_3	B_1	A	a	1 | 0	1	1	-1	-1	1	$i\varphi_0^1$
D_4	Γ_4	B_3	B_2	a	1 | -1	1	-1	-1	1	1	$i\sqrt{1/2}(\varphi_1^1-\varphi_{-1}^1)$
D_5	Γ_5	$\bar{E}$	$\bar{E}$	a	$1/2$ | $1/2$ $-1/2$	2	0	0	0	0	$\varphi_{1/2}^{1/2}$, $\varphi_{-1/2}^{1/2}$

$$D_{2h}\otimes\Theta = D_2\otimes\Theta\otimes C_i - mmm1' = 2221'\otimes\bar{1};\ D_5(d_0) = \left\| \begin{smallmatrix} & -1 \\ 1 & \end{smallmatrix} \right\|$$

Таблица 10б

$D_\alpha(D_4\otimes\Theta)$	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7
$D_\beta(D_2\otimes\Theta)$	D_1	D_3	D_1	D_3	D_2+D_4	D_5	D_5

Табл. 10. г.

$[2121|111]=1$ $\quad$ $[2131|411]=1$

$[3131|111]=1$ $\quad$ $[2141|311]=1$

$[4141|111]=1$ $\quad$ $[3141|211]=1$

Таблица 10в

	1	2	3	4	5
1	[1]	2	3	4	5
2	2	[1]	4	3	5
3	3	4	[1]	2	5
4	4	3	2	[1]	5
5	5	5	5	5	[2+3+4]+{1}

U^{55} β	$\overset{*}{1}$	2	3	4
ρ_β	1	1	1	1
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$ \ b	1	1	1	1
51 51		$\sqrt{1/2}$		$i\sqrt{1/2}$
51 52	$\sqrt{1/2}$		$i\sqrt{1/2}$	
52 51	$-\sqrt{1/2}$		$i\sqrt{1/2}$	
52 52		$\sqrt{1/2}$		$-i\sqrt{1/2}$

U^{25} β	$\overset{*}{5}$	$\overset{*}{5}$
ρ_β	1	1
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$ \ b	1	2
21 51		-1
21 52	1	

U^{35} β	$\overset{*}{5}$	$\overset{*}{5}$
ρ_β	1	1
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$ \ b	1	2
31 51	i	
31 52		$-i$

U^{45} β	$\overset{*}{5}$	$\overset{*}{5}$
ρ_β	1	1
$\beta_1 b_1\ \beta_2 b_2$ \ b	1	2
41 51		$-i$
41 52	$-i$	

Таблица 11а

G	$u\in H\subset G$	a_o	$\psi_b^{\beta\tau_\beta}$
$D_2(C_2)=2'2'2$	$E\ C_2$	$C_2^x\theta$	
$C_{2v}(C_2)=m'm'2$	$E\ C_2$	$\sigma_x\theta$	
$C_{2v}(C_s)=m'm2'$	$E\ \sigma_y$	$\sigma_x\theta$	

D_β	Δ^β				$j(D_\beta)$	$M(D_\beta)$				
D_1	Γ_1	A	A'	a	0	0	1	1	1	φ_0^0
D_2	Γ_2	B	A''	a	1	1	1	-1	-1	φ_1^1
D_3	Γ_3	${}^1\bar{E}$	${}^1\bar{E}$	a	$1/2$	$1/2$	1	i	i	$\varphi_{1/2}^{1/2}$
D_4	Γ_4	${}^2\bar{E}$	${}^2\bar{E}$	a	$1/2$	$-1/2$	1	$-i$	$-i$	$\varphi_{-1/2}^{1/2}$

$$D_{2h}(C_{2h})=D_2(C_2)\otimes C_i - m'm'm=2'2'2\otimes\bar{1}$$

Таблица 11б

$D_\alpha(D_2\otimes\Theta)$	$D_1\ D_2\ D_3\ D_4$	D_5
$D_\beta[D_2(C_2)]$	$D_1\ D_2\ D_1\ D_2$	D_3+D_4

Таблица 11в

	1	2	3	4
1	[1]	2	3	4
2	2	[1]	4	3
3	3	4	[2]	1
4	4	3	1	[2]

Таблица 11г

$[2121\,|\,111]=1$ $\quad$ $[2131\,|\,411]=-1$

$[3131\,|\,211]=1$ $\quad$ $[2141\,|\,311]=1$

$[4141\,|\,211]=1$ $\quad$ $[3141\,|\,111]=1$

МОНОКЛИННАЯ СИНГОНИЯ

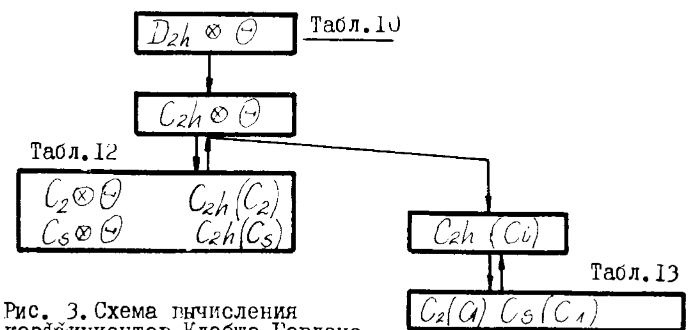

Рис. 3. Схема вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений

Таблица 12а

G	$u\in H\subset G$	a_o	$\psi_b^{\beta\tau_\beta}$
$C_2\otimes\Theta=21'$	$E\ C_2$	θ	
$C_s\otimes\Theta=m1'$	$E\ \sigma$	θ	
$C_{2h}(C_2)=2/m'$	$E\ C_2$	$I\theta$	
$C_{2h}(C_s)=2'/m$	$E\ \sigma$	$I\theta$	

D_β	Δ^β				$j(D_\beta)$	$M(D_\beta)$				
D_1	Γ_1	A	A'	a	0	0	1	1	1	φ_0^0
D_2	Γ_2	B	A''	a	1	1	1	-1	1	$\sqrt{1/2}(\varphi_1^1+\varphi_{-1}^1)$
D_3	$\left\{\begin{matrix}\Gamma_3\\ \Gamma_4\end{matrix}\right.$	$\begin{matrix}{}^1\bar{E}\\ {}^2\bar{E}\end{matrix}$	$\begin{matrix}{}^1\bar{E}\\ {}^2\bar{E}\end{matrix}$	c	$1/2$	$1/2\ \ -1/2$	$\left\{\begin{matrix}1\\ 1\end{matrix}\right.$	$\begin{matrix}i\\ -i\end{matrix}$	0	$\varphi_{1/2}^{1/2},\ \varphi_{-1/2}^{1/2}$

$$C_{2h}\otimes\Theta=C_2\otimes\Theta\otimes C_i-2/m1'=21'\otimes\bar{1}$$

Таблица 12б

$D_\alpha(D_2\otimes\Theta)$	$D_1\ D_2\ D_3\ D_4$	D_5
$D_\beta(C_2\otimes\Theta)$	$D_1\ D_2\ D_1\ D_2$	D_3

Таблица 12в

	1	2	3
1	[1]	2	3
2	2	[1]	3
3	3	3	$[1+2^2]+\{1\}$

$D_5(a_o)=\|\ {}_{i}^{\ 1}\ \|$

Таблица 12г

$[2121\,|\,111]=1$

$\beta_1 b_1$	$\beta_2 b_2$	U^{23}: β $\overset{*}{3}$, ρ_β 1, b 1	β $\overset{*}{3}$, ρ_β 1, b 2
21	31		-1
21	32	1	

$\beta_1 b_1$	$\beta_2 b_2$	U^{33}: β $\overset{*}{1}$, ρ_β 1, b 1	β 1, ρ_β 2, b 1	β 2, ρ_β 1, b 1	β 2, ρ_β 2, b 1
31	31			$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$
31	32	$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}\,i$		
32	31	$-\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/2}\,i$		
32	32			$\sqrt{1/2}$	$-i\sqrt{1/2}$

$j(\beta\rho_\beta)$: 0 , 1 , 2

Таблица 13а

G	u	a	$\psi_b^{\beta\tau_\beta}$
$C_2(C_1)=2'$	E	$C_2^z\theta$	
$C_s(C_1)=m'$	E	$\sigma_z\theta$	

D_β	Δ^β		$j(D_\beta)$	$M(D_\beta)$			
D_1	$\Gamma_1=A$	a	0	0	1	1	φ_0^0
D_2	$\Gamma_2=\bar{A}$	a	$1/2$	$1/2$	1	i	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{1/2}^{1/2}+\varphi_{-1/2}^{1/2})$

$$C_{2h}(C_i)=C_2(C_1)\otimes C_i-2'/m'=2'\otimes\bar{1}$$

Таблица 13б

$D_\alpha(C_2\otimes\Theta)$	$D_1\ D_2$	D_3
$D_\beta[C_2(C_1)]$	$D_1\ D_1$	$2D_2$

Таблица 13в

	1	2
1	[1]	2
2	2	[1]

Таблица 13г

$[2121\,|\,111]=i$

ТРИКЛИННАЯ СИНГОНИЯ

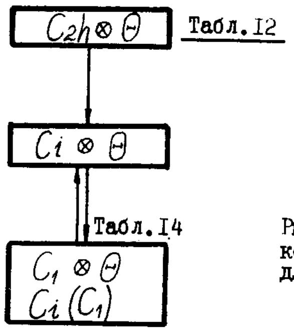

Рис. 4. Схема вычисления коэффициентов Клебша-Гордана для копредставлений.

Таблица I4а

G					u	a_0	$\psi_b^{\beta\tau_\beta}$
$C_1 \otimes \Theta = 11' = 1'$					E	Θ	
$C_i(C_1) = \bar{1}'$					E	$I\Theta$	
D_β	Δ^β		$j(D_\beta)$	$\mu(D_\beta)$			
D_1	$\Gamma_1 = A$	a	0	0	1	1	φ_0^0
D_2	$\Gamma_2 = \bar{A}$, $\Gamma_2 = \bar{A}$	b	$1/2$	$1/2 \ -1/2$	1, 1	0	$\varphi_{1/2}^{1/2}, \varphi_{-1/2}^{1/2}$

$$C_i \otimes \Theta = C_1 \otimes \Theta \otimes C_i - \bar{1}1' = 1' \otimes \bar{1}$$

Таблица I4б

$D_\alpha(C_{2h} \otimes \Theta)$	D_1	D_2	D_3
$D_\beta(C_i \otimes \Theta)$	D_1	D_1	D_2

Таблица I4в

	1	2
1	[1]	2
2	2	$[1^3] + \{1\}$

$$D_2(a_0) = \left\| {}_1{}^{-1} \right\|$$

Таблица I4г

$U^{22\beta}$ $\beta_1 b_1$ $\beta_2 b_2$	β: 1* / p_β: 1 / b: 1	1 / 2 / 1	1 / 3 / 1	1 / 4 / 1
21 21			$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$
21 22	$\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
22 21	$-\sqrt{1/2}$	$i\sqrt{1/2}$		
22 22			$\sqrt{1/2}$	$-i\sqrt{1/2}$

ЛИТЕРАТУРА

1. И.Н.Коцев, М.И. Аройо. Сообщения ОИЯИ, Р17-10987, Дубна, 1977.
2. J.N.Kotzev, M.I.Aroyo. XI International Congress of Crystallography, August 1978, Warsaw, Abstract 01.1.15.
3. И.Н.Коцев, М.И.Аройо. Сообщения ОИЯИ, Р17-11906, Дубна, 1978.
4. И.Н.Коцев, М.И.Аройо. Сообщения ОИЯИ, Р17-11908, Дубна, 1978.
5. G.F.Koster, J.O.Dimmock, R.G.Wheeler, H.Statz. Properties of the Thirty-two Point Groups. MIT-Press, Cambridge, Mass., 1963.
6. В.Хейне. Теория групп в квантовой механике, ИЛ, М.,1963.
7. И.Н.Коцев. К теории копредставлений магнитных групп. ИРЭ АН УССР, Харьков, 1972.

Рукопись поступила в издательский отдел 21 сентября 1978 года.